

Laboratorium z Krystalografii

Kombinacje elementów symetrii.

Klasy symetrii.

2 godz.

Cel ćwiczenia: tworzenie kombinacji elementów symetrii makroskopowej oraz przedstawienie projekcji cyklograficznych i stereograficznych grup punktowych.

Pomoce naukowe: modele komórek elementarnych.

Wstęp teoretyczny.

Kombinacje elementów symetrii makroskopowej

W kryształach elementy symetrii makroskopowej mogą występować pojedynczo (tylko jedna n -krotna oś symetrii, tylko jedna płaszczyzna itd.) oraz w różnych kombinacjach (zespołach).

Udowodniono, że liczba dopuszczalnych kombinacji elementów symetrii przechodzących przez środek geometryczny kryształu i odtwarzających jego symetrię wynosi 22.

W kryształach występują kombinacje:

- osi symetrii
- osi symetrii i osi symetrii inwersyjnych
- osi symetrii i środka symetrii

Klasy symetrii są to różne, możliwe w kryształach kombinacje (zespoły) makroskopowych elementów symetrii przecinających się w jednym punkcie. Klasy symetrii nazywa się grupami punktowymi lub klasami krystalograficznymi. Sieciowa budowa kryształów powoduje, że liczba klas symetrii jest ograniczona, możliwe są jedynie **32 grupy punktowe** w ich skład wchodzi elementy symetrii makroskopowej: pięć osi symetrii (1, 2, 3, 4, 6) i pięć osi inwersyjnych ($\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$) oraz 22 dozwolone oryginalne kombinacje elementów symetrii makroskopowej.

Kolejność zapisu elementów symetrii w grupach punktowych poszczególnych układów krystalograficznych została ustalona umownie. Zasady tworzenia międzynarodowych symboli krystalograficznych klas symetrii zostały przedstawione w Tablicy 6. Układ trójskośny został pominięty ze względu na występowanie tylko osi formalnej 1 i środka symetrii $\bar{1}$.

Kombinacje osi symetrii

Istnieje 6 dopuszczalnych trójek przecinających się osi właściwych:

Tablica 1. Grupy osi symetrii i kąty między poszczególnymi osiami

Lp.	Układ krystalograficzny	X Y Z	X [^] Y	X [^] Z	Y [^] Z
1	rombowy	2 2 2	90 ⁰	90 ⁰	90 ⁰
2	trygonalny	3 2 2	90 ⁰	90 ⁰	60 ⁰
3	tetragonalny	4 2 2	90 ⁰	90 ⁰	45 ⁰
4	heksagonalny	6 2 2	90 ⁰	90 ⁰	30 ⁰
5	regularny	4 3 2	54 ⁰ 44'	45 ⁰	35 ⁰ 16'
6	regularny	2 3 3	54 ⁰ 44'	54 ⁰ 44'	70 ⁰ 32'

Kombinacje osi symetrii i osi inwersyjnych

Dopuszczalne kombinacje osi symetrii właściwych z osiami inwersyjnymi otrzymuje się przez zamianę dwóch parzystokrotnych osi symetrii na osie inwersyjne. W rezultacie otrzymujemy 7 nowych kombinacji elementów symetrii.

Tablica 2. Grupy elementów symetrii powstałe z kombinacji osi symetrii i osi inwersyjnych

Lp.	Układ krystalograficzny	Kombinacje osi symetrii	Kombinacje osi symetrii i osi inwersyjnych
1	rombowy	222	mm2 ($\bar{2} \bar{2} \bar{2}$)
2	trygonalny	32	3m ($3\bar{2}$)
3	tetragonalny	422	4mm ($4\bar{2} \bar{2}$)
4	tetragonalny	422	$\bar{4}2m$ ($\bar{4} \bar{2} \bar{2}$)
5	heksagonalny	622	6mm ($6\bar{2} \bar{2}$)
6	heksagonalny	622	$\bar{6}m2$ ($\bar{6} \bar{2} \bar{2}$)
7	regularny	432	$\bar{4}3m$ ($\bar{4} \bar{3} \bar{2}$)

Kombinacje osi symetrii i środka symetrii

I. Jeżeli środek symetrii leży na osiach parzystokrotnych, to przez ten środek symetrii muszą przechodzić również płaszczyzny symetrii prostopadłe do tych osi.

Tablica 3. Kombinacje parzystokrotnych osi symetrii i środka symetrii

Lp.	Układ krystalograficzny	Oś symetrii	Kombinacje parzystokrotnych osi symetrii i środka symetrii
1	jednoskośny	2	$\frac{2}{m}$
2	tetragonalny	4	$\frac{4}{m}$
3	heksagonalny	6	$\frac{6}{m}$

II. Jeżeli środek symetrii leży na osiach nieparzystokrotnych, to osie te staną się osiami inwersyjnymi. W tej kombinacji nie uzyskuje się oryginalnych zespołów elementów symetrii.

Tablica 4. Kombinacje nieparzystokrotnych osi symetrii i środka symetrii

Lp.	Układ krystalograficzny	Oś symetrii	Kombinacje nieparzystokrotnych osi symetrii i środka symetrii
1	trójskośny	1	$\bar{1}$
2	trygonalny	3	$\bar{3}$

III. Jeżeli środek symetrii doda się do punktu przecięcia osi symetrii w dozwolonych kombinacjach trójek osi, to w stosunku do osi parzystokrotnych musi wystąpić prostopadła płaszczyzna symetrii, osie 3 staną się osiami inwersyjnymi.

Tablica 5. Kombinacje zespołu osi symetrii i środka symetrii

Lp.	Układ krystalograficzny	Kombinacje osi symetrii	Kombinacje zespołu osi symetrii i środka symetrii
1	rombowy	222	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (mmm)*
2	trygonalny	32	$\bar{3} \frac{2}{m}$ ($\bar{3}m$)
3	tetragonalny	422	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ ($\frac{4}{m}mm$)
4	heksagonalny	622	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ ($\frac{6}{m}mm$)
5	regularny	432	$\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$ (m3m)
6	regularny	23	$\frac{2}{m} \bar{3}$ (m3)

*W nawiasach podano skrócone symbole grup punktowych!

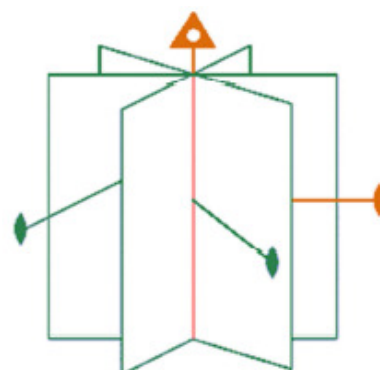
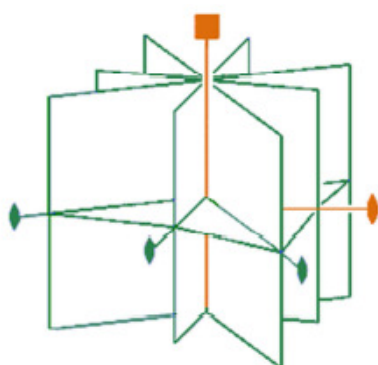
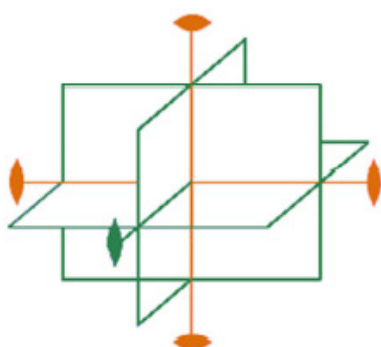
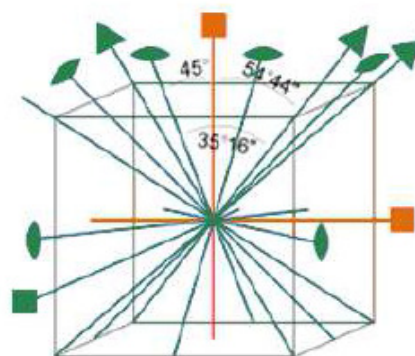
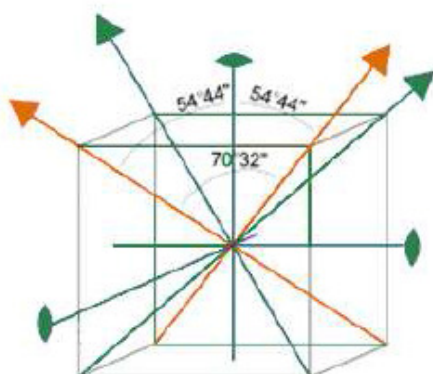
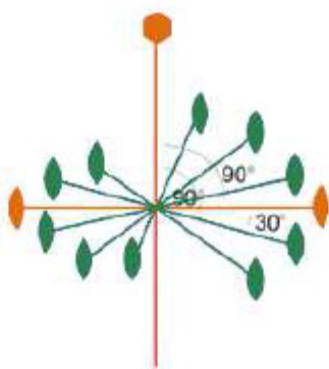
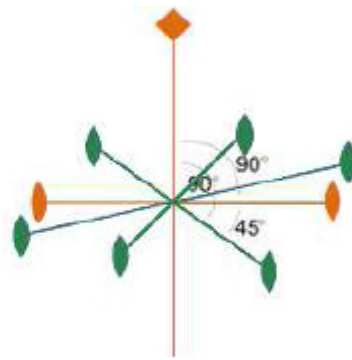
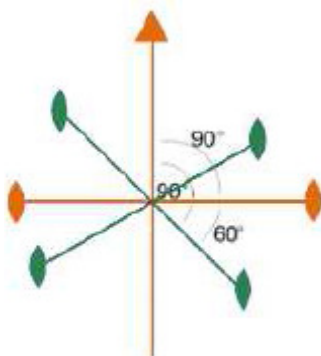
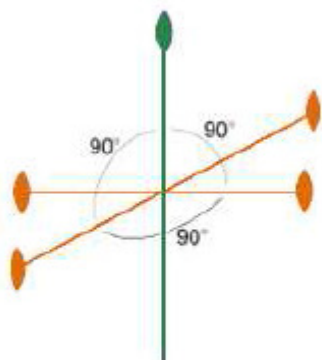
Tablica 6. Zasady tworzenia międzynarodowych symboli krystalograficznych klas symetrii

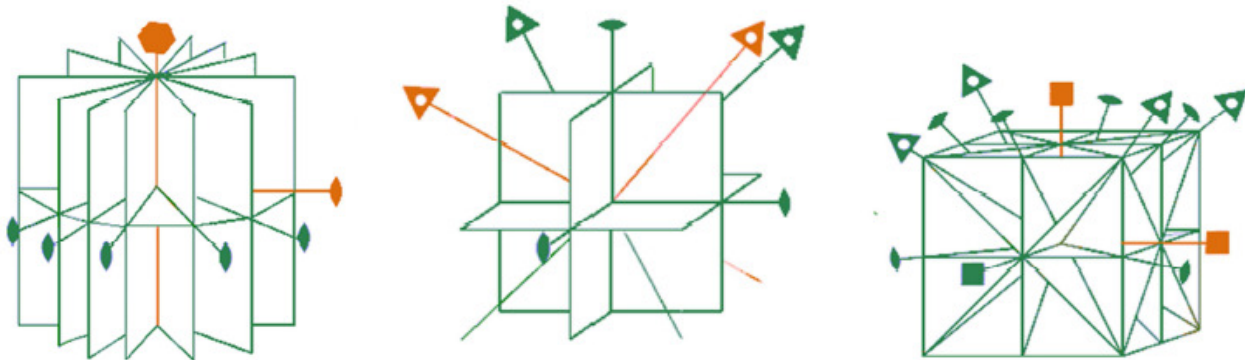
Układ krystalograficzny	Grupa punktowa	Pozycja w symbolu		
		1	2	3
Jednoskośny	2	2 do osi Y		
	m	m ⊥ do osi Y		
	2/m	2 i m ⊥ do osi Y		
Rombowy	222	2 do osi X	2 do osi Y	2 do osi Z
	mm2	m ⊥ do osi X	m ⊥ do osi Y	2 do osi Z
	2/m2/m2/m	2 i m ⊥ do osi X	2 i m ⊥ do osi Y	2 i m ⊥ do osi Z
Tetragonalny	4	4 do osi Z		
	$\bar{4}$	$\bar{4}$ do osi Z		
	4/m	4 i m ⊥ do osi Z		
	422	4 do osi Z	dwie osie 2 do osi X, Y	dwie osie 2 do <110>
	4mm	4 do osi Z	dwie m ⊥ do osi X, Y	dwie m ⊥ do <110>
	$\bar{4}2m$	$\bar{4}$ do osi Z	dwie osie 2 do osi X, Y	dwie m ⊥ do <110>
	4/m2/m2/m	4 i m ⊥ do osi Z	dwie osie 2 i dwie m ⊥ do osi X, Y	dwie osie 2 i dwie m ⊥ do <110>
Heksagonalny	6	6 do osi Z		
	$\bar{6}$	$\bar{6}$ do osi Z		
	6/m	6 i m ⊥ do osi Z		
	622	6 do osi Z	trzy 2 do osi X, Y, U	trzy osie 2 do <110>
	6mm	6 do osi Z	trzy m ⊥ do osi X, Y, U	trzy m ⊥ do <110>
	$\bar{6}m2$	$\bar{6}$ do osi Z	trzy m ⊥ do osi X, Y, U	trzy osie 2 do <110>
	6/m2/m2/m	6 i m ⊥ do osi Z	trzy osie 2 i trzy m ⊥ do osi X, Y, U	trzy osie 2 i trzy m ⊥ do <110>
Trygonalny	3	3 do osi Z		
	$\bar{3}$	$\bar{3}$ do osi Z		
	32	3 do osi Z	trzy 2 do osi X, Y, U	
	3m	3 do osi Z	trzy m ⊥ do osi X, Y, U	
	$\bar{3}2/m$	$\bar{3}$ do osi Z	trzy osie 2 i trzy m ⊥ do osi X, Y, U	
Regularny	432	trzy osie 4 do osi X, Y, Z	cztery osie 3 do <111>	sześć osi 2 do <110>
	$\bar{4}3m$	trzy osie $\bar{4}$ do osi X, Y, Z	cztery osie 3 do <111>	sześć m ⊥ do <110>
	4/m $\bar{3}2/m$	trzy osie 4 i trzy m ⊥ do osi X, Y, Z	cztery osie $\bar{3}$ do <111>	sześć osi 2 i sześć m ⊥ do <110>
	23	trzy osie 2 do osi X, Y, Z	cztery osie 3 do <111>	
	2/m $\bar{3}$	trzy osie 2 i trzy m ⊥ do osi X, Y, Z	cztery osie $\bar{3}$ do <111>	

Wykonanie ćwiczenia:

Zadanie 1

Pod każdym z podanych rysunków wpisz odpowiedni symbol grupy punktowej





Zadanie 2

Podaj, co oznaczają poszczególne pozycje w symbolach następujących grup punktowych:

$$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}; \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}; mm2; \bar{6}m2; 2/m \bar{3}; 3m$$

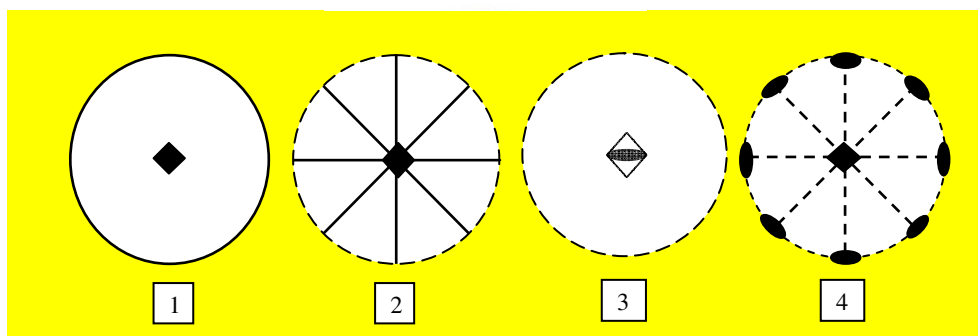
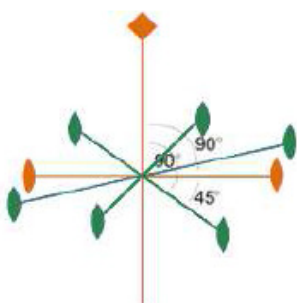
Zadanie 3

Przy każdym podanym symbolu grupy punktowej wpisz właściwy układ krystalograficzny:

- a) 222
- b) 3m
- c) 23
- d) 432
- e) 422
- f) 6mmm
- g) 1
- h) 2/m

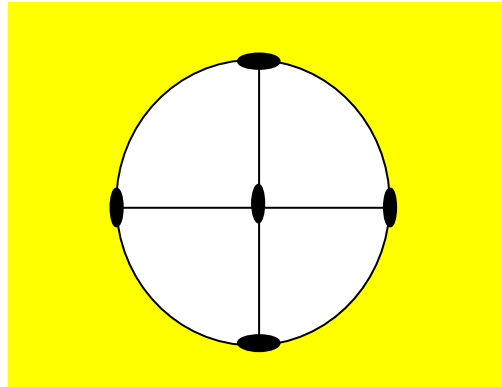
Zadanie 4

Przedstawionej poniżej kombinacji elementów symetrii przyporządkuj projekcję cyklograficzną.



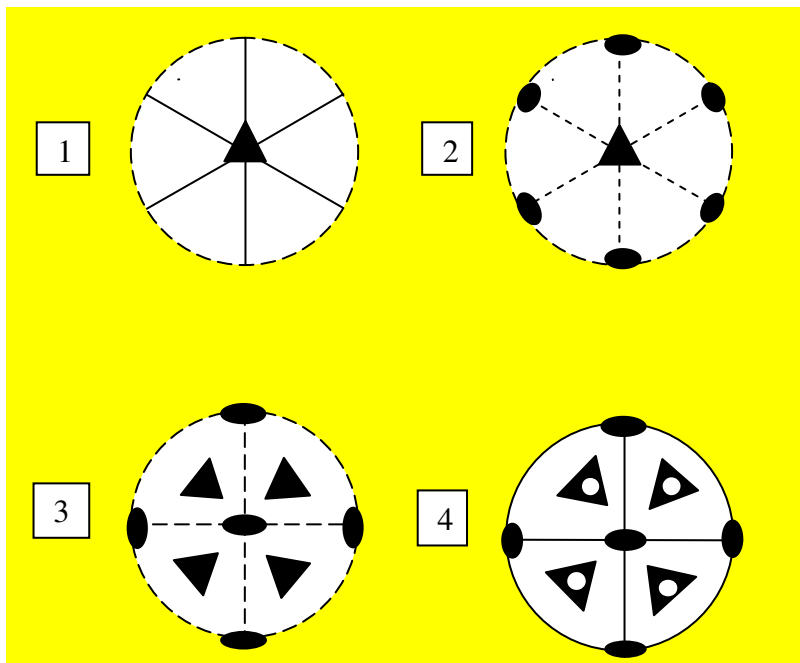
Zadanie 5

Podaj symbol międzynarodowy grupy punktowej, której elementy symetrii przedstawione zostały na poniższej projekcji.

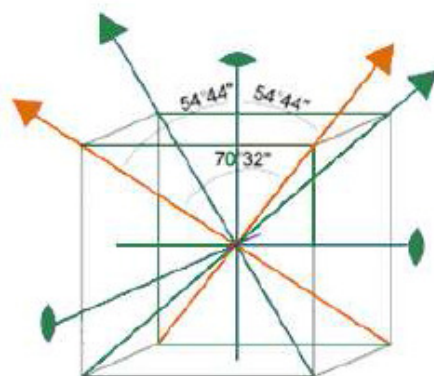


Zadanie 6

Która z projekcji

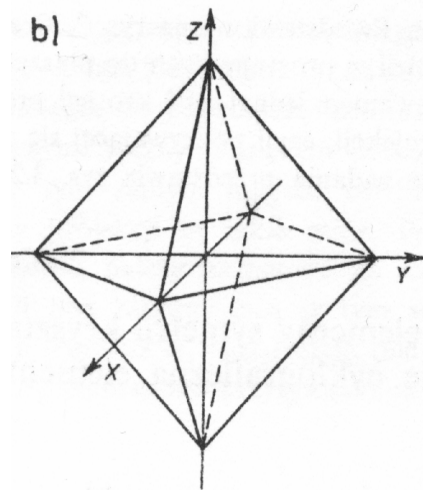
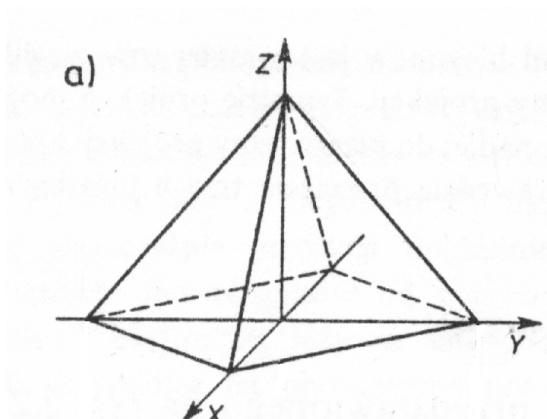


odpowiada przedstawionej kombinacji elementów symetrii



Zadanie 7

Na rysunku poniżej przedstawiono piramidę i bipyramidę tetragonalną. Określić elementy symetrii poszczególnych figur geometrycznych i na tej podstawie podać grupę punktową oraz narysować jej projekcję.



Literatura

1. Z.Trzaska-Durski, H.Trzaska-Durska, "Podstawy krystalografii strukturalnej rentgenowskiej", PWN Warszawa 1994.
2. Z.Trzaska-Durski i H.Trzaska-Durska, „Podstawy krystalografii”, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2003.
3. Z.Bojarski, M.Gigla, K.Stróż, M.Surowiec, „Krystalografia”, PWN, Warszawa 2007.
4. Z.Kosturkiewicz, „Metody krystalografii”, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2004.
5. Z.Bojarski, H.Habla i M.Surowiec, „Materiały do nauki krystalografii”, PWN, Warszawa 1986.
6. M. Van Meerssche i J.Feneau-Dupont, „Krystalografia i chemia strukturalna“, PWN, Warszawa 1984.